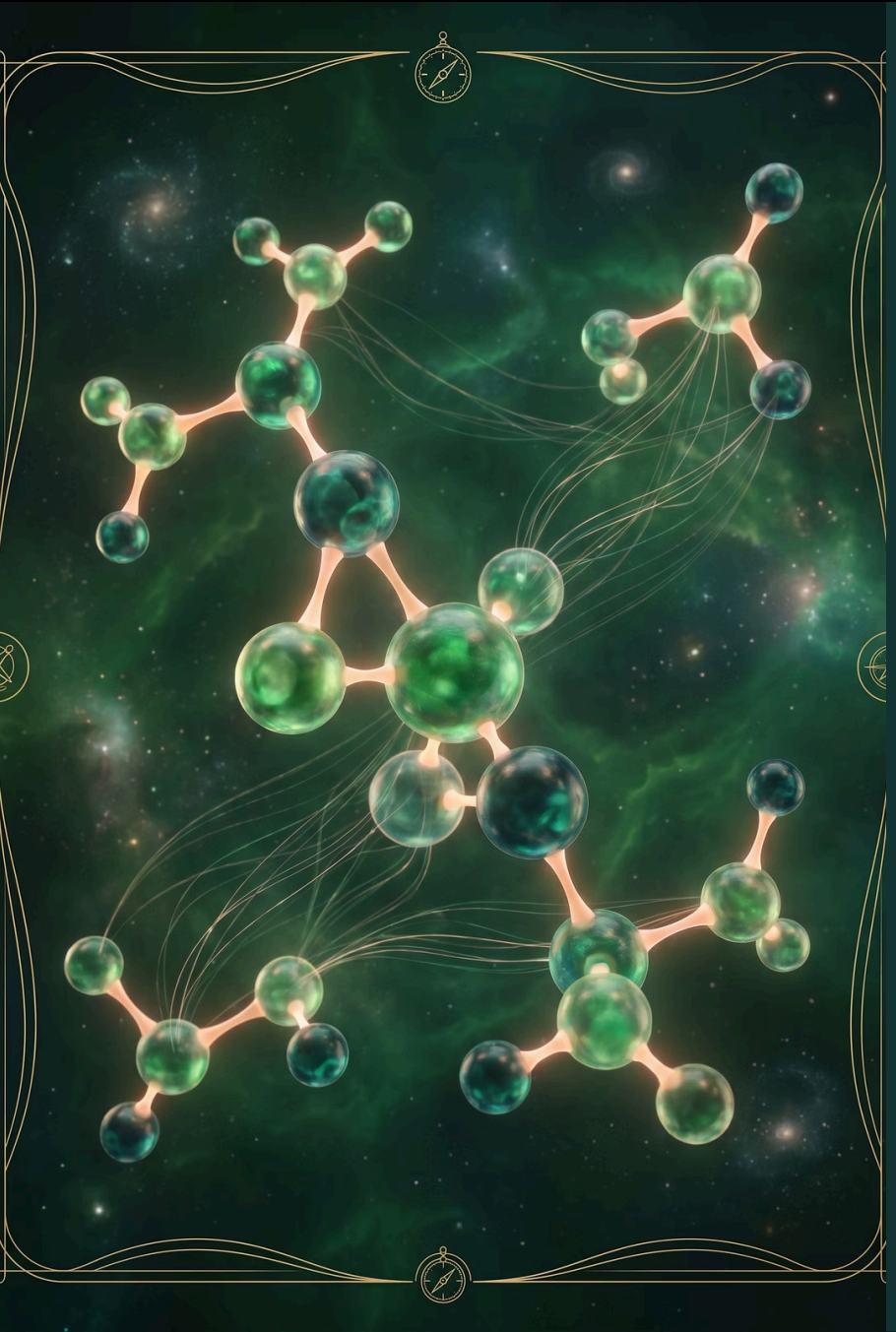


Moleküller Arası Kuvvetler

Ders Sunumu

Teradigma

Görünmez Ama Vazgeçilmez

Atomları bağlayan kovalent ve iyonik bağlar molekülün *kimliğini* belirler; moleküller arası kuvvetler ise moleküllerin *topluluk davranışını* tayin eder.

→ Elektrostatik Köken

Temelde elektrostatik kökenlidir: yük dağılımındaki kalıcı veya geçici dengesizliklerden kaynaklanır

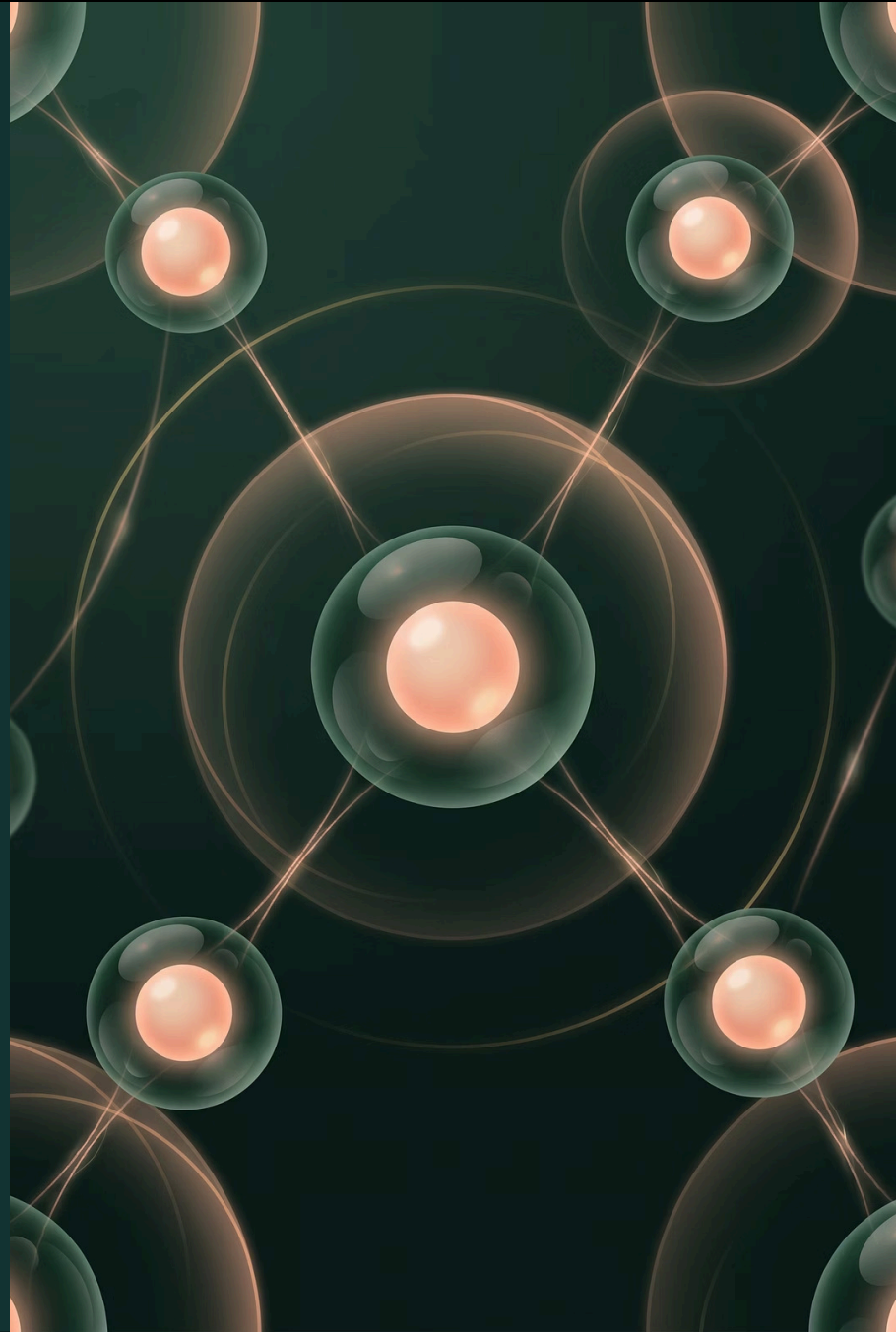
→ Madde Hallerini Belirler

Sıvı, katı ve gaz hallerini; kaynama–erime noktalarını; çözünürlüğü belirler

→ Kuantum Mekaniksel Köken

Kuantum mekaniksel dalgalanmaların da bir sonucudur

> 💭 Bu kuvvetler bir an yok olsa okyanuslar buharlaşır, bedenimiz dağılır — var olmamız, bunların her an tutulmasına bağlıdır.



Maddenin Halleri: Termal Enerji ile Çekim Arasındaki Denge

⚡ Gaz Fazı

Kinetik enerji, çekim kuvvetlerine baskın gelir; moleküller serbestçe hareket eder

💧 Sıvı ve Katı Faz

Moleküller arası kuvvetler, molekülleri belirli bir düzen veya yakınlıkta tutar

🌍 Kozmik Denge

Bu denge, evreni kaos olmaktan çıkarıp yaşanabilir bir kozmos haline getiren temel dinamiklerden biridir

London Dağılım Kuvvetleri: Evrensel Yapıştırıcı

Tüm atom ve moleküllerde mevcut olan; gaz, sıvı veya katı — istisnasız her maddede işleyen kuvvettir.

01

Anlık Dipol Oluşumu

Elektronların kuantum mekaniksel hareketi sırasında anlık olarak çekirdeğin bir tarafında yoğunlaşması → geçici dipol

02

İndüklenmiş Dipol

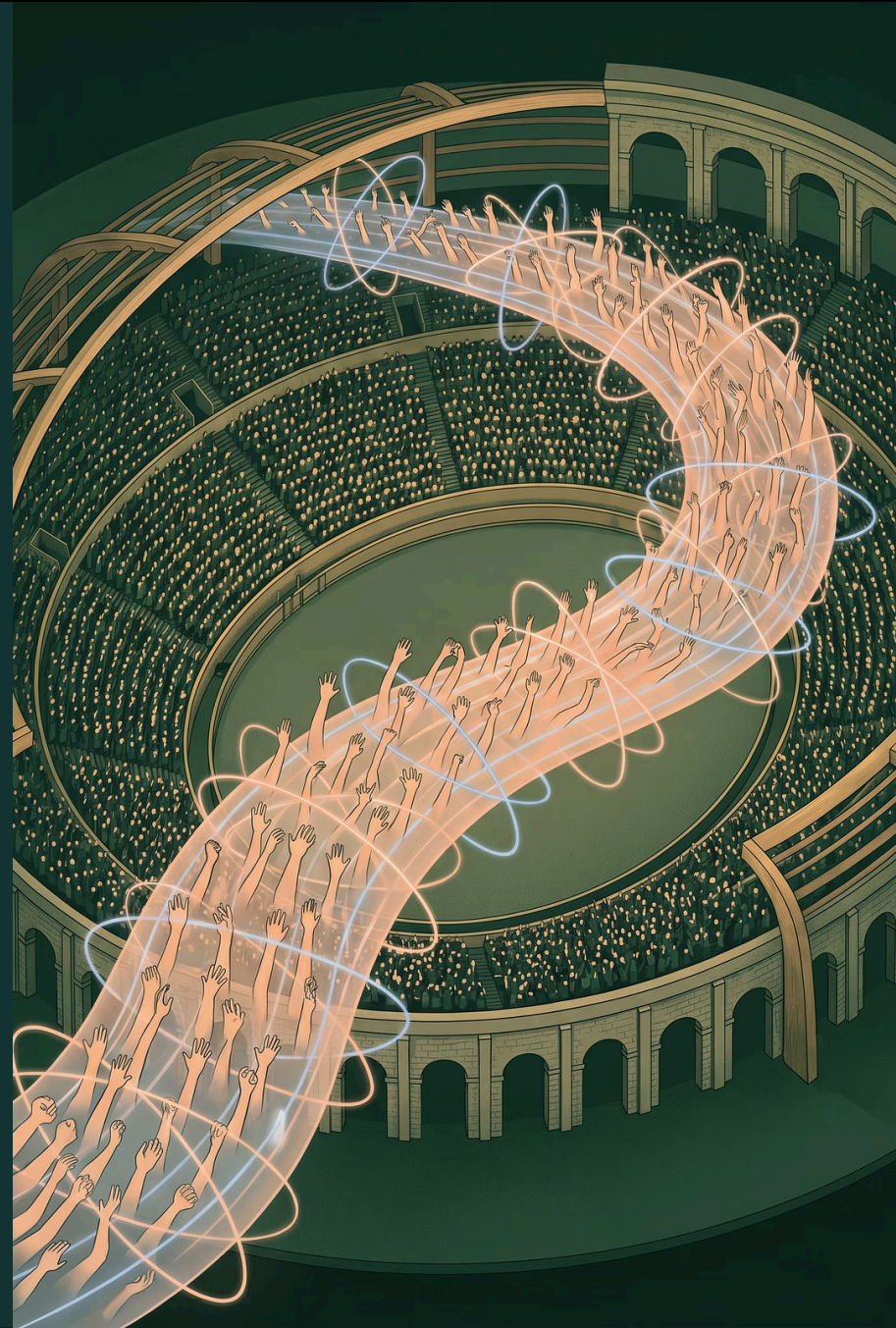
Geçici dipol, komşu atomda indüklenmiş dipol oluşturur → elektrostatik çekim

03

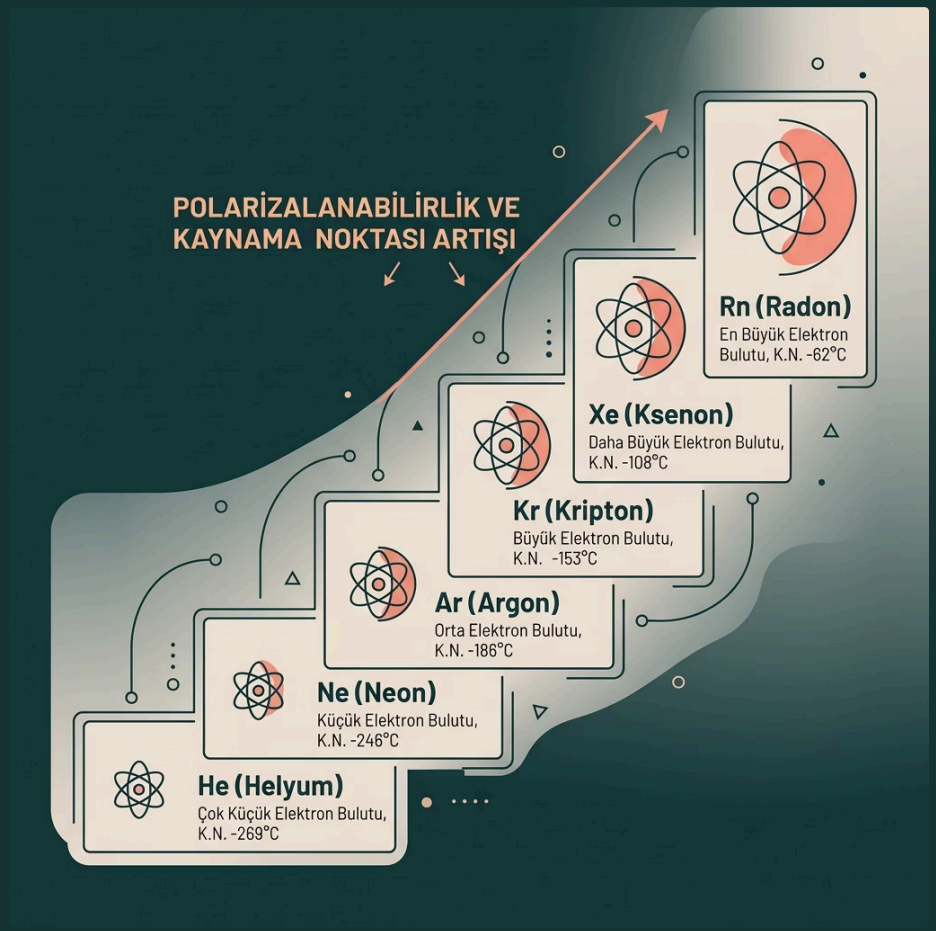
Fritz London (1930)

Elektron korelasyonu ile açıklanmıştır

> 🏟️ Stadyumdaki seyircilerin "Meksika dalgası" gibi — elektronların bu senkronize hareketi, moleküller arasında bir çekim dalgası oluşturur.



Polarizabilite: Elektron Bulutunun Esnekliği



Elektron Bulutu ve Kuvvet İlişkisi

Kuvvetin büyüklüğü, atomun elektron bulutunun ne kadar kolay deforme edilebildiğine bağlıdır.

> Büyük elektron bulutu → çekirdeğin tutuşu gevşek → daha kolay deforme → daha güçlü dağılım kuvveti

Soygazlarda Örnek

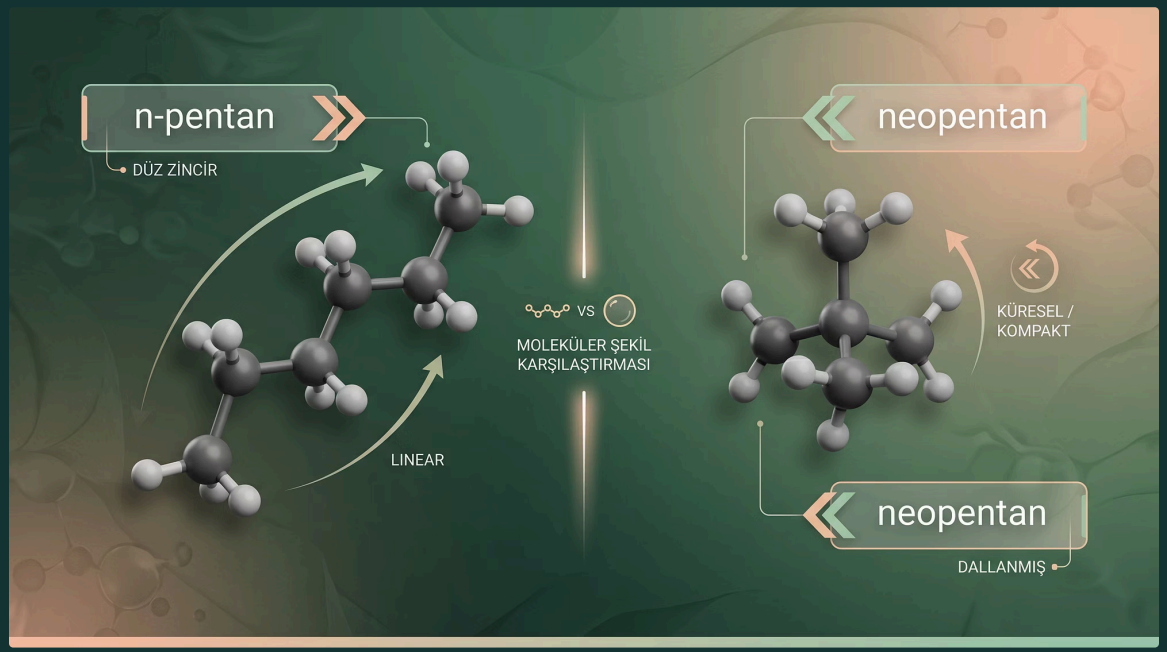
He –269°C'de kaynarken Rn –62°C'de kaynar

Halojenlerde Örnek

F_2 –188°C'de kaynarken I_2 oda sıcaklığında katıdır, 184°C'de kaynar

Moleküler Şekil ve Temas Yüzeyi

Aynı kimyasal formül, farklı geometri → farklı kaynama noktası.



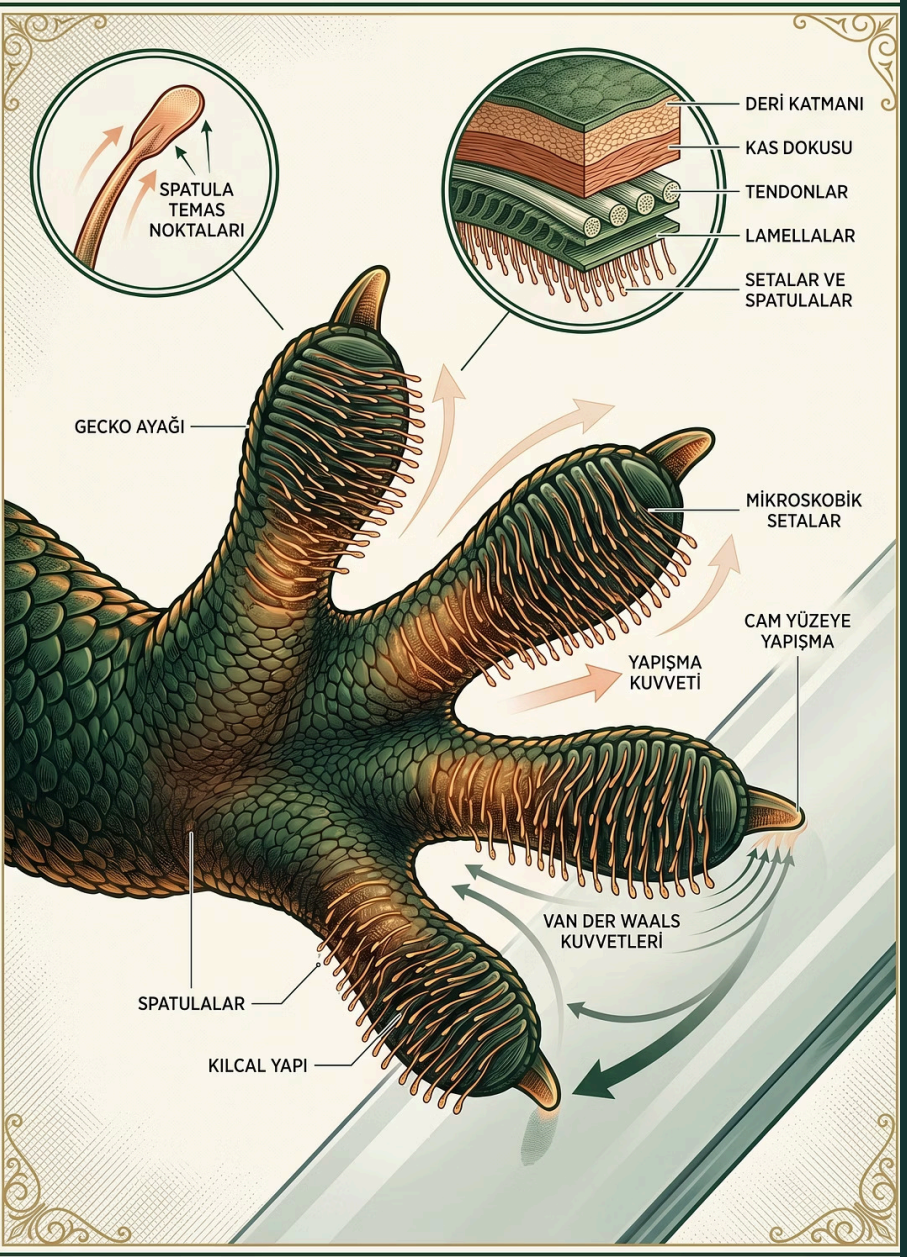
n-Pentan (Düz Zincir)

Moleküller birbirine geniş yüzeyden "sarılır" → kaynama noktası **36°C**

Neopentan (Küresel, Dallanmış)

Moleküller yalnızca küçük noktalardan temas eder → kaynama noktası **9,5°C**

> 🔗 İki cırt cırt bandı ne kadar geniş yüzeyden temas ederse, ayrılması o kadar zor olur.



Gecko Ayakları: Zayıf Kuvvetlerin Birleşik Gücü

London kuvvetlerinin makro dünyadaki en çarpıcı örneği:

Mikroskobik Tüyler (Setae)

Kertenkelenin ayaklarında milyonlarca mikroskobik tüy bulunur

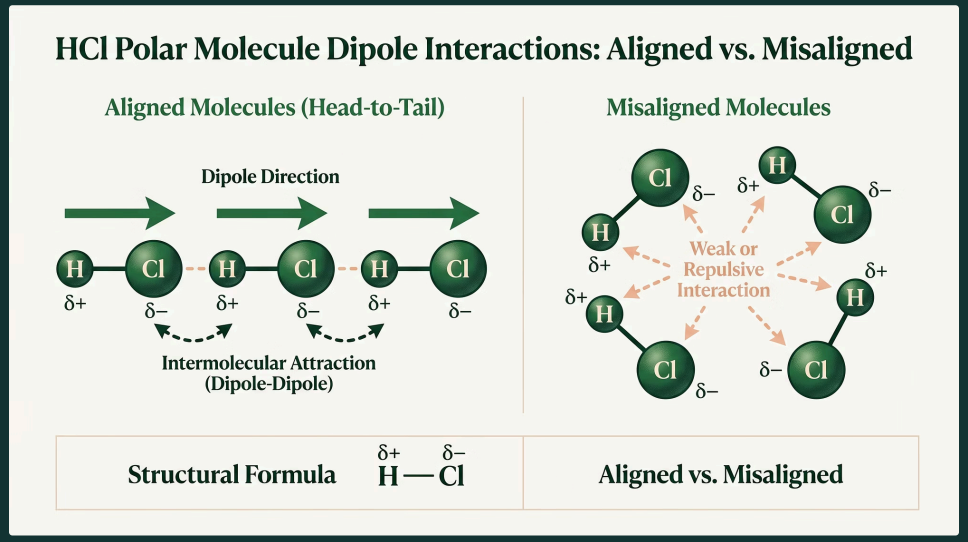
Atomik Yakınlık

Her tüy, yüzeyle o kadar yakın temas kurar ki tüylerdeki atomlarla yüzeydeki atomlar arasında milyarlarca zayıf London kuvveti oluşur

Birleşik Güç

Tek başına ihmal edilebilir bu kuvvetler, milyonlarcası bir arada kertenkelenin ağırlığını taşıyacak yapışma gücü ortaya koyar

Dipol-Dipol Etkileşimleri: Kalıcı Kutupların Çekimi



Polar moleküllerde elektronegatiflik farkından kalıcı yük ayrışması oluşur.

1. **HCl Örneği**
   Cl kısmi negatif, H kısmi pozitif yüklüdür

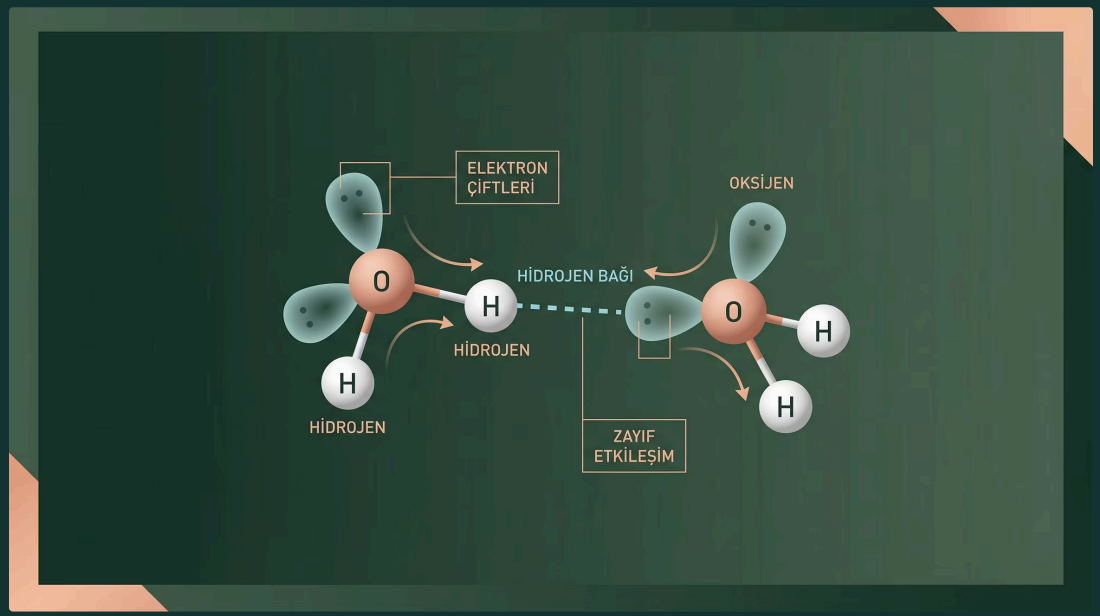
2. **Yönelim**
   Moleküller bir araya geldiğinde zıt yüklü uçlar birbirini çekecek şekilde yönelir

3. **Mesafe Etkisi**
   London kuvvetlerinden genellikle daha güçlüdür; mesafe arttıkça etkisi hızla azalır

Aseton veya kloroform gibi polar sıvıların kaynama noktası, benzer kütledeki apolar sıvılardan daha yüksektir.

Hidrojen Bağı: Tanımı ve Koşulları

Moleküller arası kuvvetlerin en özeli; biyolojik yaşam için en kritiğidir.



Oluşum Koşulu

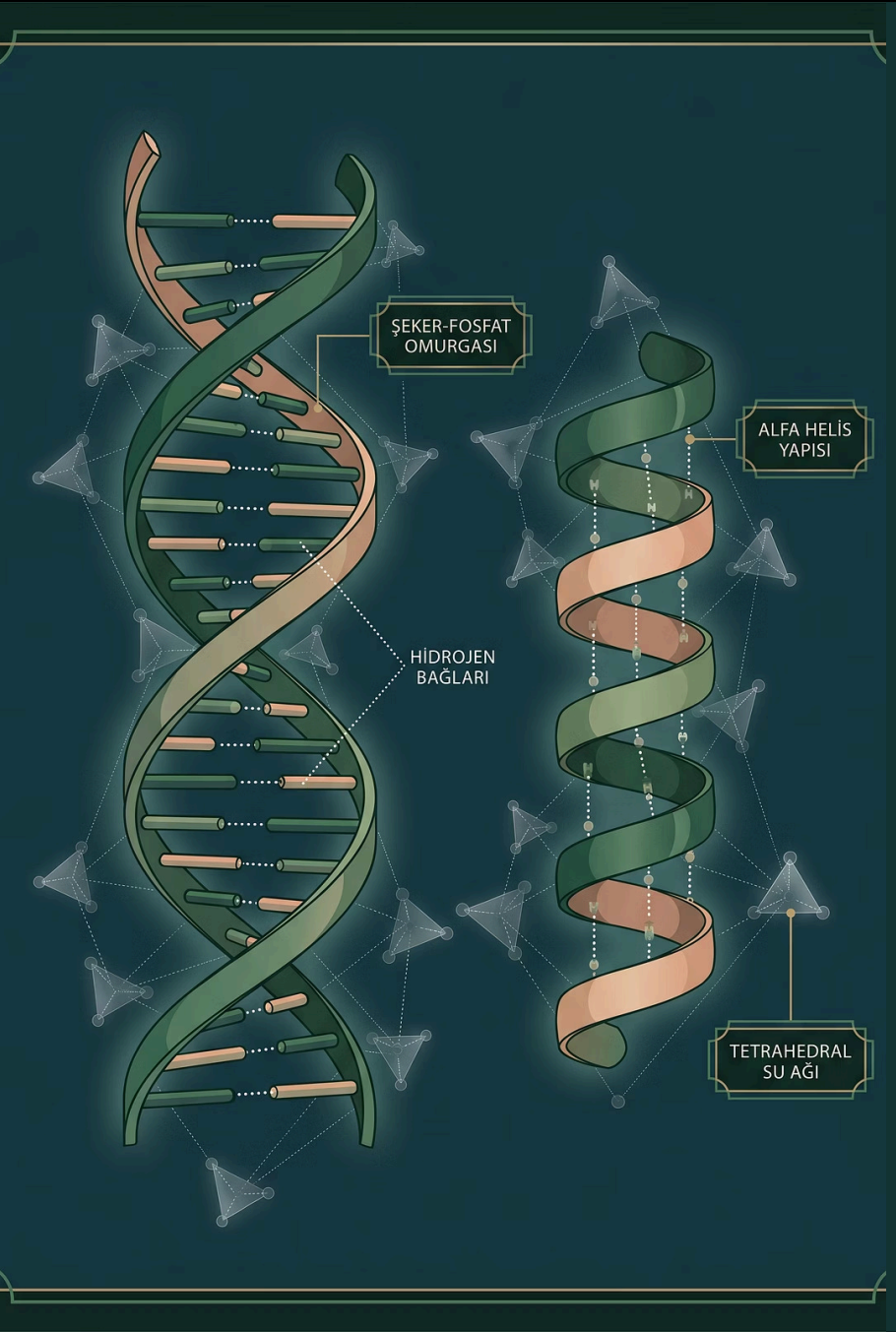
H atomu, yüksek elektronegatifliğe sahip N, O veya F'ye kovalent bağlıyken; başka bir elektronegatif atomun ortaklanmamış elektron çiftiyle etkileşime girer

Güç Karşılaştırması

Kovalent bağdan ~20 kat daha zayıf; ancak tipik Van der Waals kuvvetlerinden çok daha güçlü

Yönlülük

En kritik özelliği: **yönlülük** — donör ve akseptör atomlar arasında köprü genellikle doğrusal bir hatta kurulur



Hidrojen Bağının Yönlülüğü: Mimarinin Temeli

Yönlü bağ, moleküllere belirli geometrik şekiller (mimari yapılar) kazandırır.

Su Molekülü

O atomu iki H'ye kovalent bağlı + iki ortaklanmamış elektron çifti → her molekül dört komşuyla bağ kurar → tetrahedral ağ

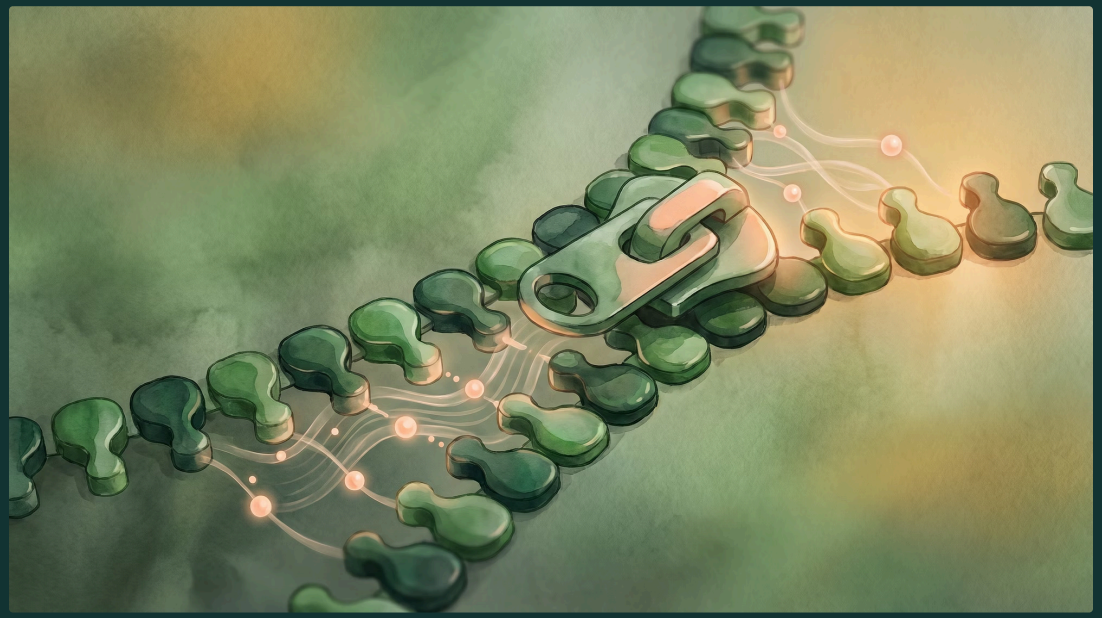
Suyun Anomalileri

Bu ağ, suyun "anomalileri"nin kaynağıdır

Biyolojik Mimari

DNA çift sarmalı, protein alfa-sarmal yapıları, enzimin aktif bölgesi — biyolojik mimarinin temeli bu yönlü bağlardır

Kooperatiflik: Zincir Etkisi



Hidrojen bağları toplu halde hareket eder; buna kooperatiflik denir.

Elektron Dağılımı Değişimi

Bir su molekülü hidrojen bağı kurduğunda, elektron dağılımı değişir ve komşu moleküllerle daha güçlü bağ kurması teşvik edilir

Fermuar Metaforu

Tek bağ kolayca kırılabilir (bir fermuarın tek dişi gibi), ancak milyonlarcası bir arada dinamik ama kararlı bir yapı oluşturur

DNA Bütünlüğü

DNA sarmalının bütünlüğü bu kooperatif ağa dayanır

Kuantum Tünelleme ve Kovalent Karakter

2024 yılında *Science* dergisinde yayımlanan araştırmalar hidrojen bağlarında kuantum etkileri olduğunu ortaya koymuştur.

Proton Tünellemesi

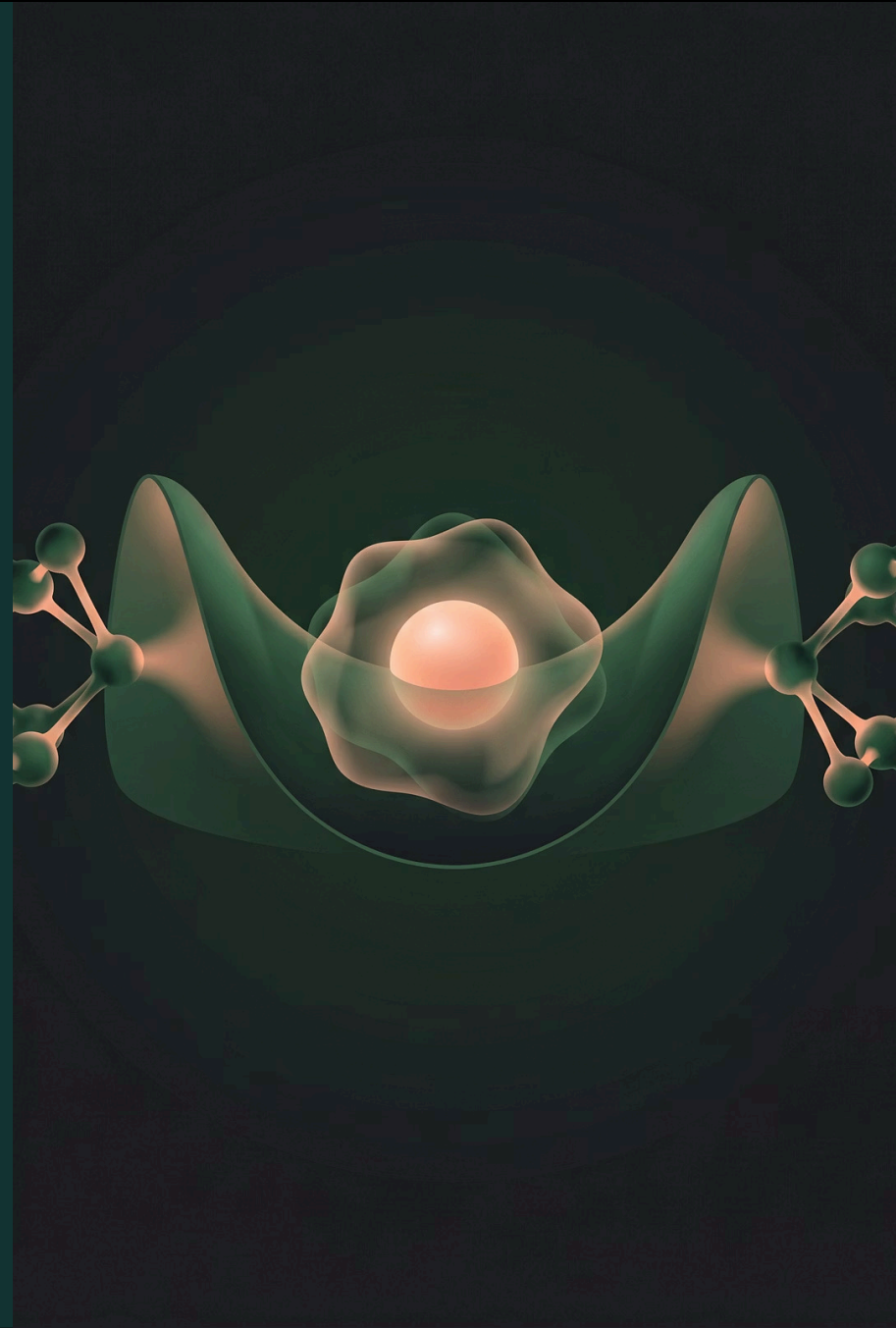
Suyun hidrojen bağı ağındaki protonlar, enerji bariyerlerini aşarak moleküller arasında tünelleme yapabilmektedir

Kovalent Karakter

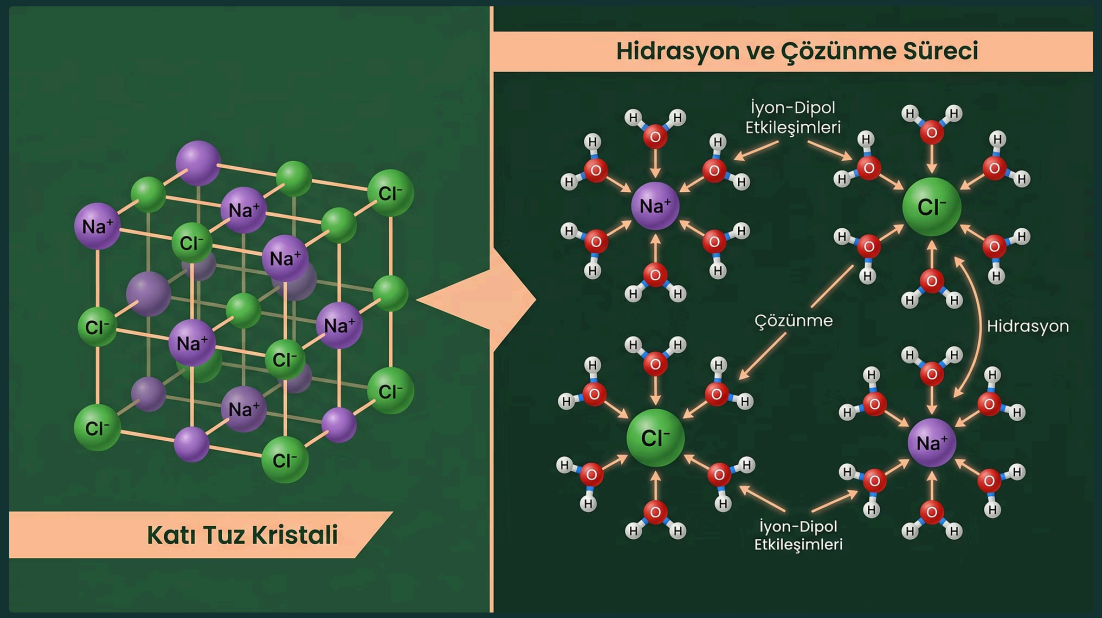
"Kısa hidrojen bağları" olarak bilinen bazı güçlü etkileşimlerde elektronlar iki molekül arasında paylaşılır; bağ kovalent karakter kazanır

Derin Kuantum Rol

Bu bulgular, suyun ve biyolojik moleküllerin işleyişinde kuantum fiziğinin derin rol oynadığını göstermektedir



İyon-Dipol Etkileşimleri ve Çözünme



Bir iyonun polar molekülün kısmi yükleri tarafından çekilmesiyle oluşur.

01

NaCl'nin Çözünmesi

Su moleküllerinin O uçları (kısmi negatif) Na^+ iyonlarını sararak kristal örgüden koparır

02

Hidratasyon Kabuğu

İyonlar "hidratasyon kabuğu" ile sarılarak çözelti içinde askıda tutulur

03

Biyolojik Önemi

Sinir iletiminden hücre içi sıvı dengesine kadar pek çok sürecin temelidir

Yeni Keşif: Tek Elektronlu Kovalent Bağ

2024 yılında *Nature* dergisinde yayımlanan, Hokkaido Üniversitesi araştırmacılarına ait çalışma:

Keşif

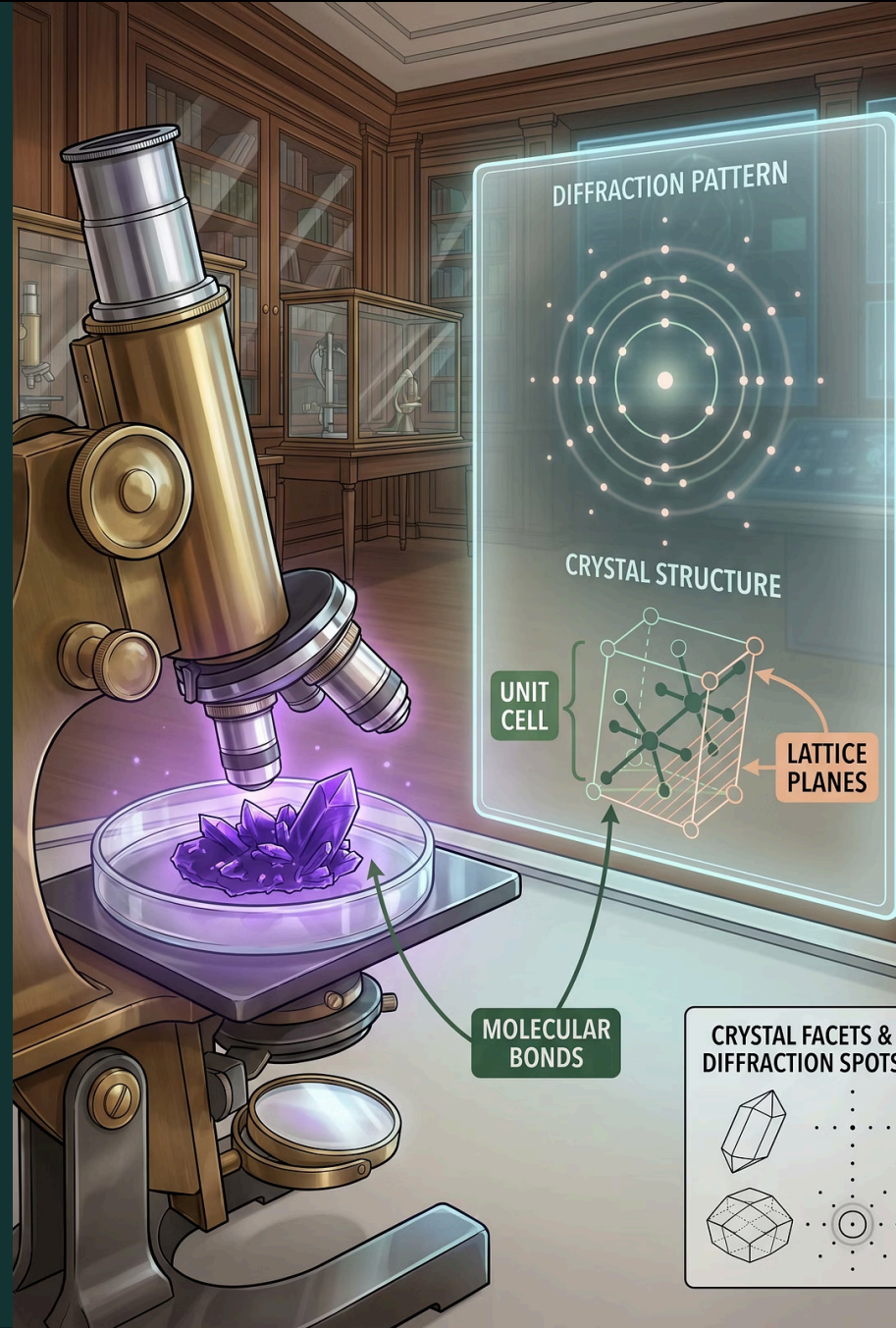
İki karbon atomu arasında tek bir elektronun paylaşılmasıyla oluşan kararlı bir sigma bağı izole edildi

Tarihsel Arka Plan

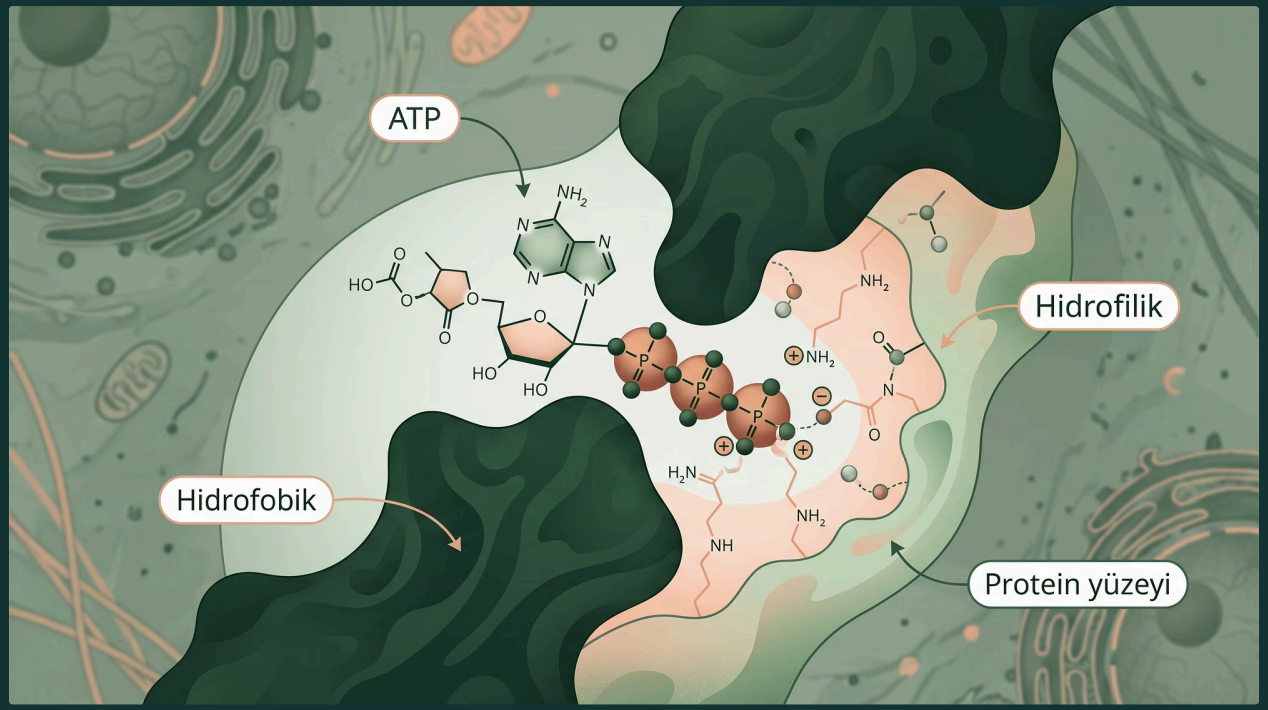
1931'de Linus Pauling tarafından teorize edilmiş, yaklaşık bir asır boyunca deneysel olarak gözlenememiş

Kanıt

Hekzaariletan türevlerinin oksidasyonuyla elde edilen mor renkli kristallerde kanıtlandı; X-ışını kırınımı, atomlar arasında ~2,9 Å uzunluğunda alışılmadık bir bağ olduğunu doğruladı



Yeni Keşif: ATP'nin Gizli Rolü



Hücrenin enerji birimi olarak bilinen ATP'nin yalnızca bir yakıt olmadığı keşfedildi.

> 💡 ATP, sisteme yalnızca enerji sağlamaz; aynı zamanda hücre içi ortamı akışkan ve işlevsel tutan bir koruyucu olarak da çalışmaktadır.

Amfifilik Yapı

ATP amfifilik yapısıyla (hem suyu seven hem sevmeyen kısımlar) proteinlerin hidrofobik yüzeylerine bağlanır, onların topaklanmasını (agregasyon) engeller

Biyolojik Hidrotrop

Bu işleve **biyolojik hidrotrop** denir

Milimolar Konsantrasyon

Hücrelerin enerji ihtiyacının çok üzerinde (milimolar seviyelerde) ATP barındırmasının açıklaması budur

Yeni Keşif: Derin Ötektik Çözücüler (DES)

Moleküller arası kuvvetlerin mühendisliğindeki ileri bir uygulama:

→ Ötektik Karışım

Normalde katı olan iki bileşen (örneğin kolin klorür ve üre) belirli oranda karıştırıldığında oda sıcaklığında sıvı karışım oluşur

→ Hidrojen Bağı Mekanizması

Bileşenler arasındaki güçlü hidrojen bağları kristalleşmeyi engeller ve erime noktasını dramatik biçimde düşürür

→ Doğadaki Benzeri

DES'ler, bitkilerin kuraklık veya donma stresinde hücrelerinde biriktirdiği maddelerle benzerlik gösterir

Suyun Anomalileri: 70'ten Fazla "Kural Dışı" Özellik

Su, kimyasal formülü basit görünmesine rağmen moleküller arası kuvvetlerin en karmaşık davranışlarını sergileyen maddedir.

70+

Anomali Sayısı

Bilim insanları suyun 70'ten fazla anomalisini tanımlamıştır

4

Komşu Molekül

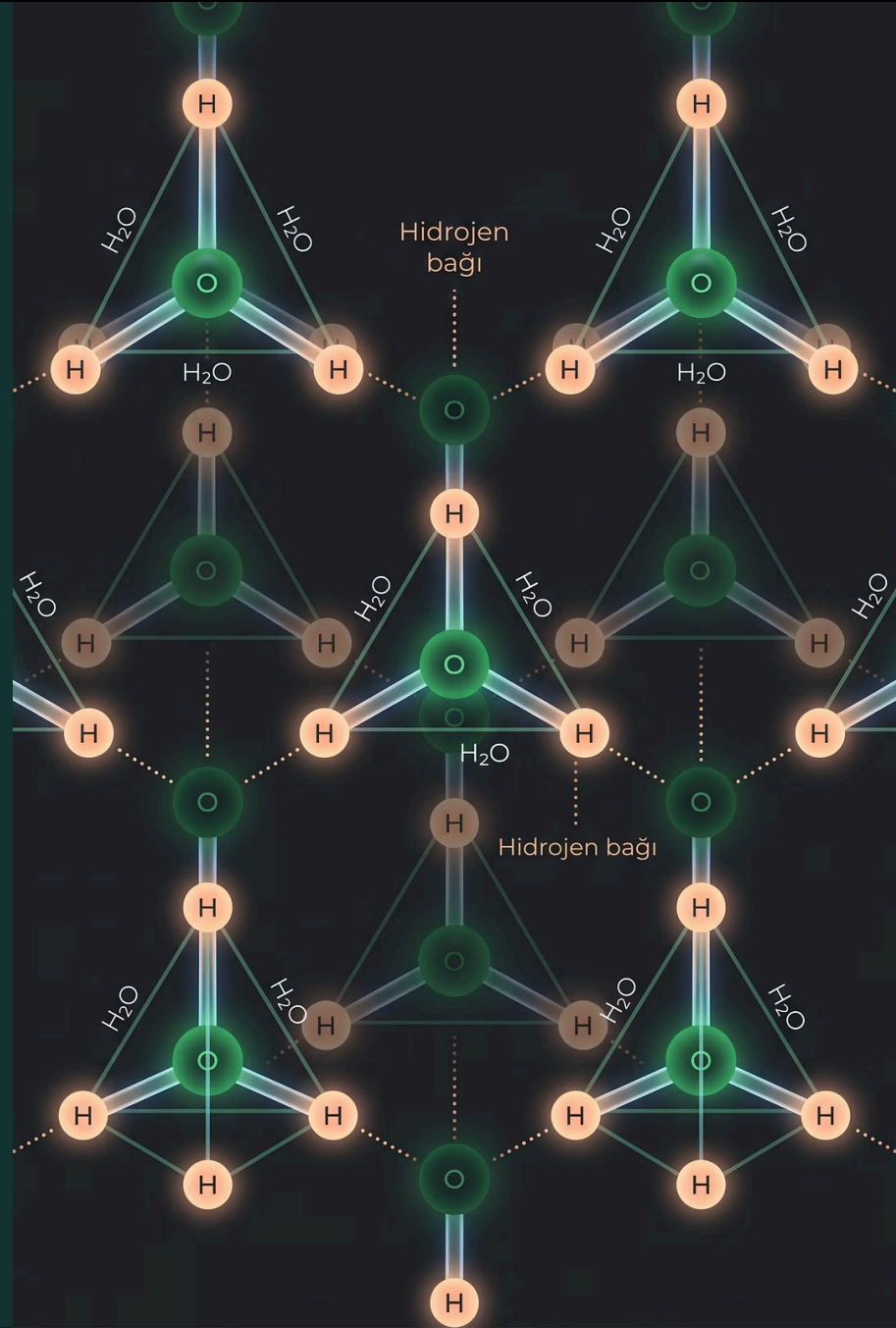
Her su molekülü tetrahedral ağda dört komşuyla bağ kurar

H_2O

Basit Formül

Bu özelliklerin kaynağı tetrahedral hidrojen bağı ağıdır

"Anomali": bilimsel dilde kural dışı — ancak yaşamın varlığı açısından bu özelliklerin her biri yaşamı mümkün kılan özel kurallardır



Buzun Yüzmesi: Yaşamı Koruyan Tersine Düzen

Çoğu maddenin aksine suyun katı hali, sıvı halinden daha düşük yoğunluğa sahiptir.

01

Altıgen Kristal Kafes

Su donarken hidrojen bağları molekülleri belirli bir mesafede tutarak içi boşluklu altıgen kristal kafes oluşturur; bu yapı sıvıdan daha fazla hacim kaplar

02

Yalıtkan Tabaka

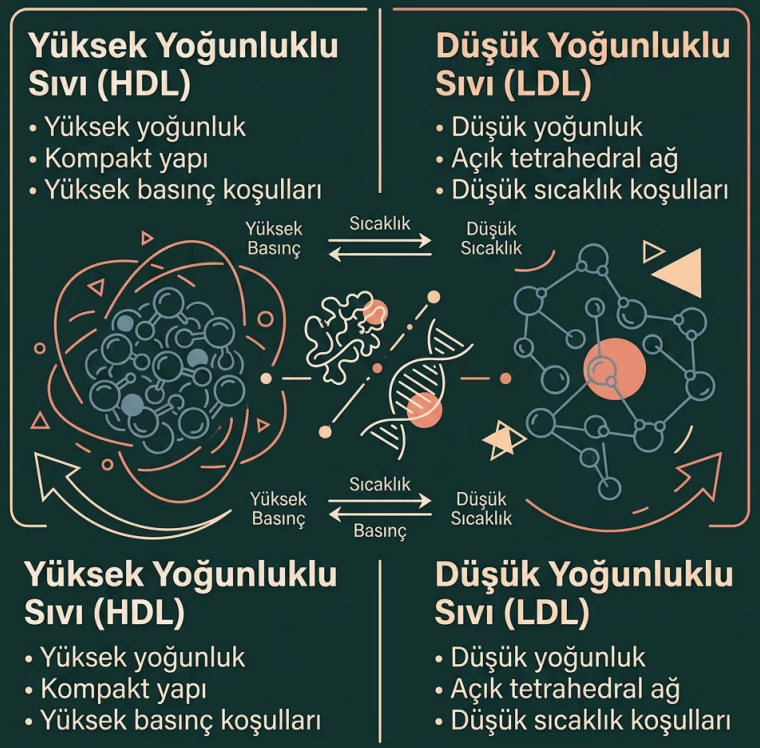
Buz yüzer → yüzey donar → oluşan buz tabakası alttaki suyu soğuktan yalıtan bir battaniye görevi görür

03

Yaşamın Korunması

Eğer buz dibe batsaydı, su kütleleri dipten yüzeye tamamen donardı; deniz yaşamı sona erer, iklim dengesi geri dönülemez şekilde bozulurdu

Suyun İki Sıvı Formu



Son araştırmalar, suyun tek bir sıvı fazından oluşmadığını ortaya koymuştur.

İki Farklı Form

Aşırı soğutulmuş koşullarda ve yüksek basınç altında **Yüksek Yoğunluklu Sıvı (HDL)** ve **Düşük Yoğunluklu Sıvı (LDL)** olmak üzere iki farklı form bir arada bulunur

Olağanüstü Uyum

Bu polimorfizm, suya değişen sıcaklık ve basınç koşullarında olağanüstü uyum yeteneği kazandırır

Biyolojik Ortam

Proteinlerin ve DNA'nın işlev görebilmesi için gereken dinamik ortam bu esnek yapı sayesinde sağlanır

Hidrojen Bağlarının Hassas Ayarı

Martin Chaplin ve diğer araştırmacıların teorik hesaplamalarına göre:

%7 Daha Güçlü Olsaydı

Su oda sıcaklığında katılaşır, kan dolaşımı ve bitki özsuyu taşınımı sağlanamazdı

%29 Daha Zayıf Olsaydı

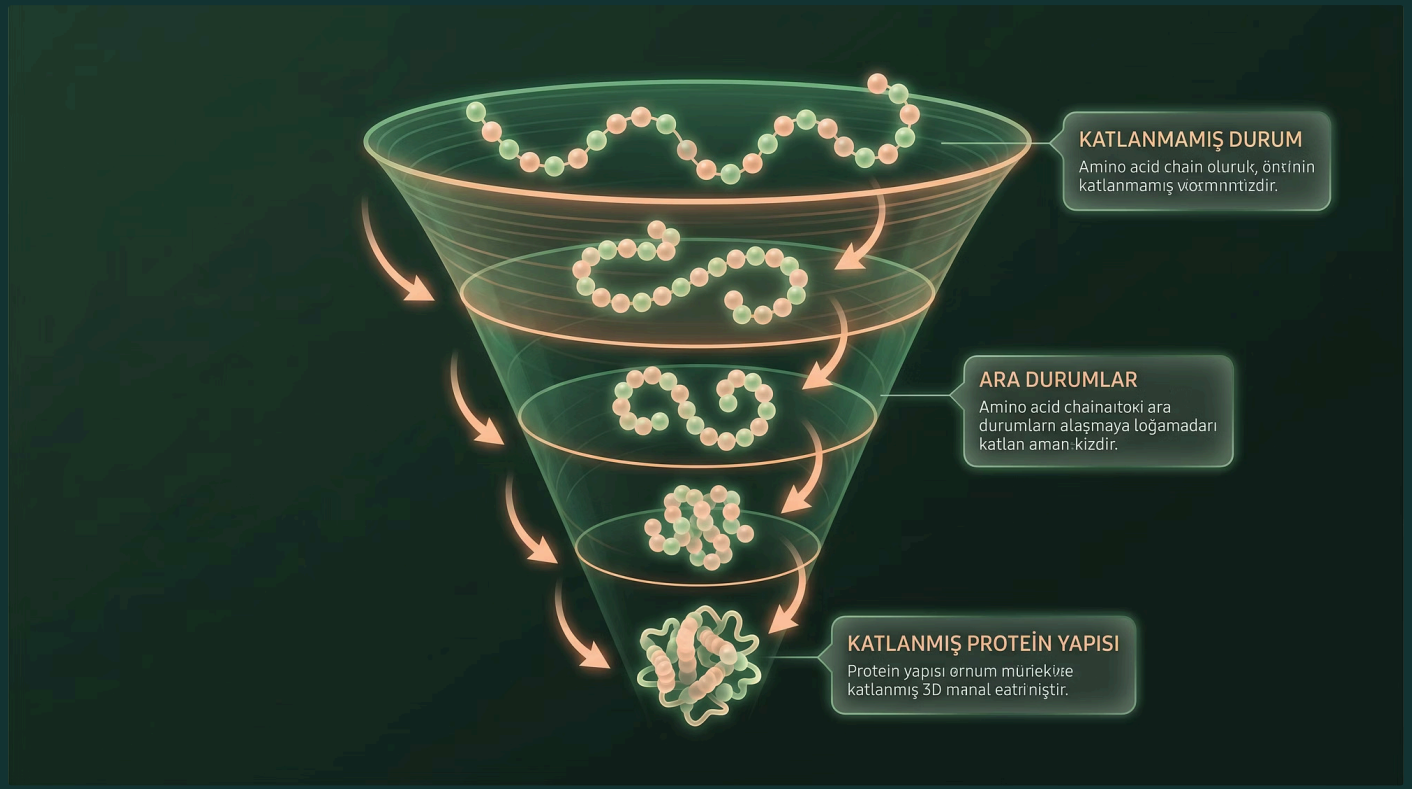
Moleküller bir arada duramaz, su tamamen buharlaşır, sıvı su gezegenden silinirdi

%2 Sapma Bile Yeterli

Maksimum yoğunluk sıcaklığı +4°C gibi kritik özellikler, bağ gücündeki %2'lik bir sapmayla bile ortadan kalkabilirdi

> 💭 Bu veriler, suyun fiziksel parametrelerinin yaşamı destekleyecek şekilde son derece dar bir aralıkta belirlendiğini göstermektedir.

Levinthal Paradoksu: Katlanma Problemi



Protein, amino asit zinciri olarak sentezlendikten sonra belirli bir 3 boyutlu yapıya katlanarak işlev kazanır.

Matematiksel İmkansızlık

Ortalama büyüklükteki bir proteinin tüm olası şekilleri rastgele denemesi, evrenin yaşından (13,8 milyar yıl) çok daha uzun sürerdi

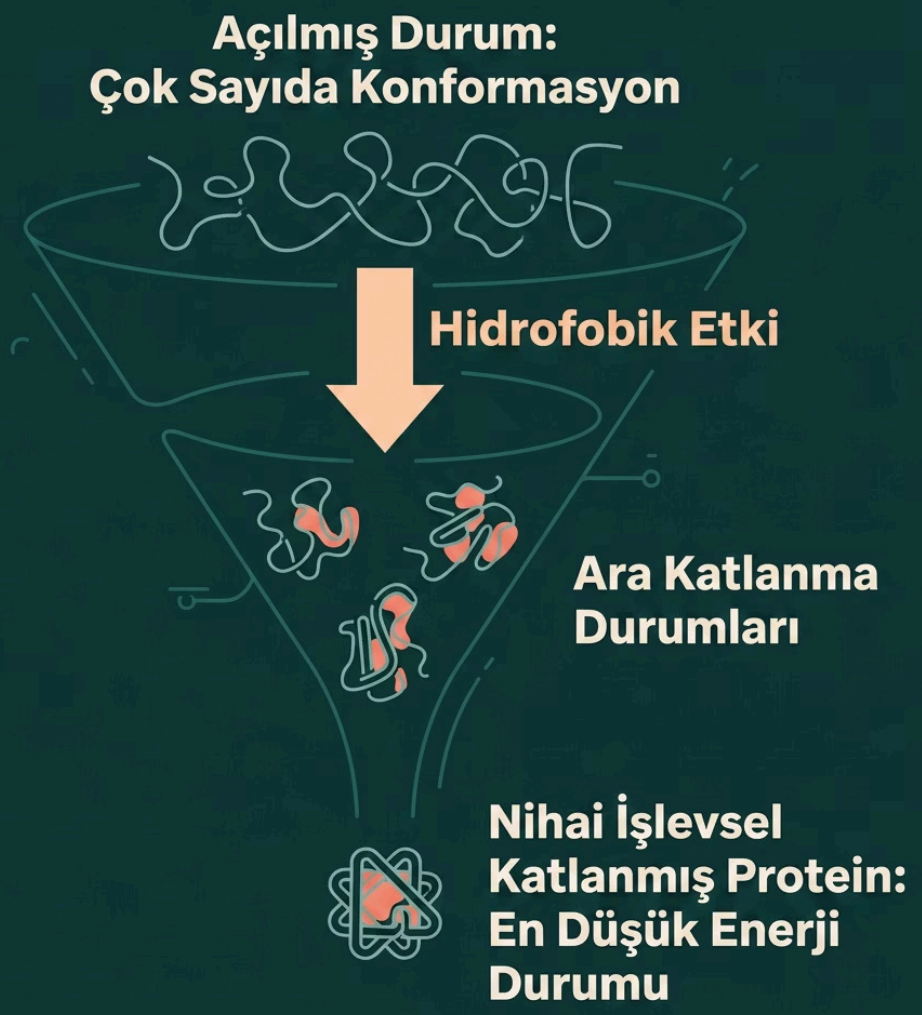
Hücre İçi Gerçeklik

Hücre içinde proteinler milisaniyeler veya saniyeler içinde hatasız biçimde doğru yapıya katlanır

Levinthal Paradoksu

Bu matematiksel imkansızlık, **Levinthal Paradoksu** olarak bilinir

Katlanma Hunisi: Yönlendirilen Süreç



Protein, en düşük enerjili ve en kararlı haline doğru, bir huninin ağzından dibine kayar gibi yönlendirilir.

→ Hidrofobik Etki

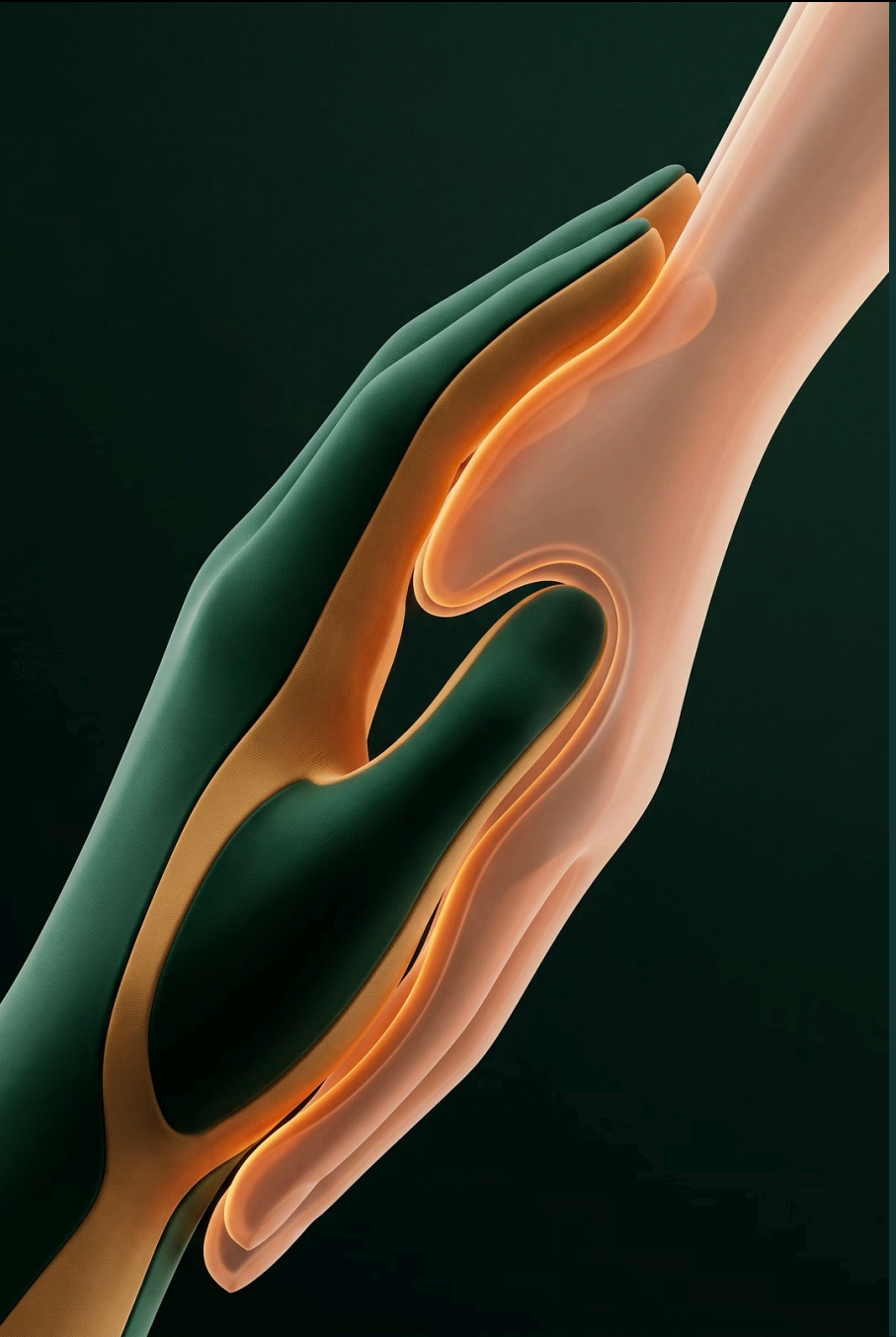
İtici güç **hidrofobik etki**: su molekülleri, proteinin apolar bölgelerini iç kısma iter

→ Hassas Paketlenme

Protein çekirdeğindeki paketlenme o kadar hassastır ki tek bir metil grubunun ($-CH_3$) eksikliği bile proteinin stabilitesini bozabilir

→ Yönlendirilmiş Süreç

Atomlar rastgele değil, belirli bir hedefe (işlevsel yapı) doğru sevk edilerek bu yapıyı oluşturur



Moleküler Tanıma: El ve Eldiven

Bir enzimin substratını, bir antikorun virüsü veya bir ilacın hedef proteinini bulması kaotik ortamda gerçekleşen hassas bir eşleşmedir.

İndüklenmiş Uyum Modeli

Klasik "Anahtar-Kilit" modelinin yerini **İndüklenmiş Uyum** modeli almıştır

Dinamik Şekil Değişimi

Eldiven (protein), el (ilaç/substrat) içine girene kadar tam şeklini almaz; her iki molekül birbirine yaklaşırken hidrojen bağları ve Van der Waals kuvvetleri etkisiyle şekil değiştirir

Su Köprüleri

Son araştırmalar, protein-ilaç arasına giren su köprülerinin bu tanımanın gizli kahramanları olduğunu göstermiştir

> 💭 Şuursuz atomların, kendilerinde bulunmayan "tanıma" ve "seçme" davranışlarını sergilemesi, onların arkasındaki ilmi göstermektedir.

Temel Kuvvetlerin Hassas Dengesi

Evrenin dört temel kuvvetinin oranları, yaşama izin veren dar aralıklarda belirlenmiştir.

⚛️ Güçlü Nükleer Kuvvet

%50 daha zayıf olsaydı: evrende yalnızca hidrojen bulunurdu, karbon ve oksijen oluşamazdı

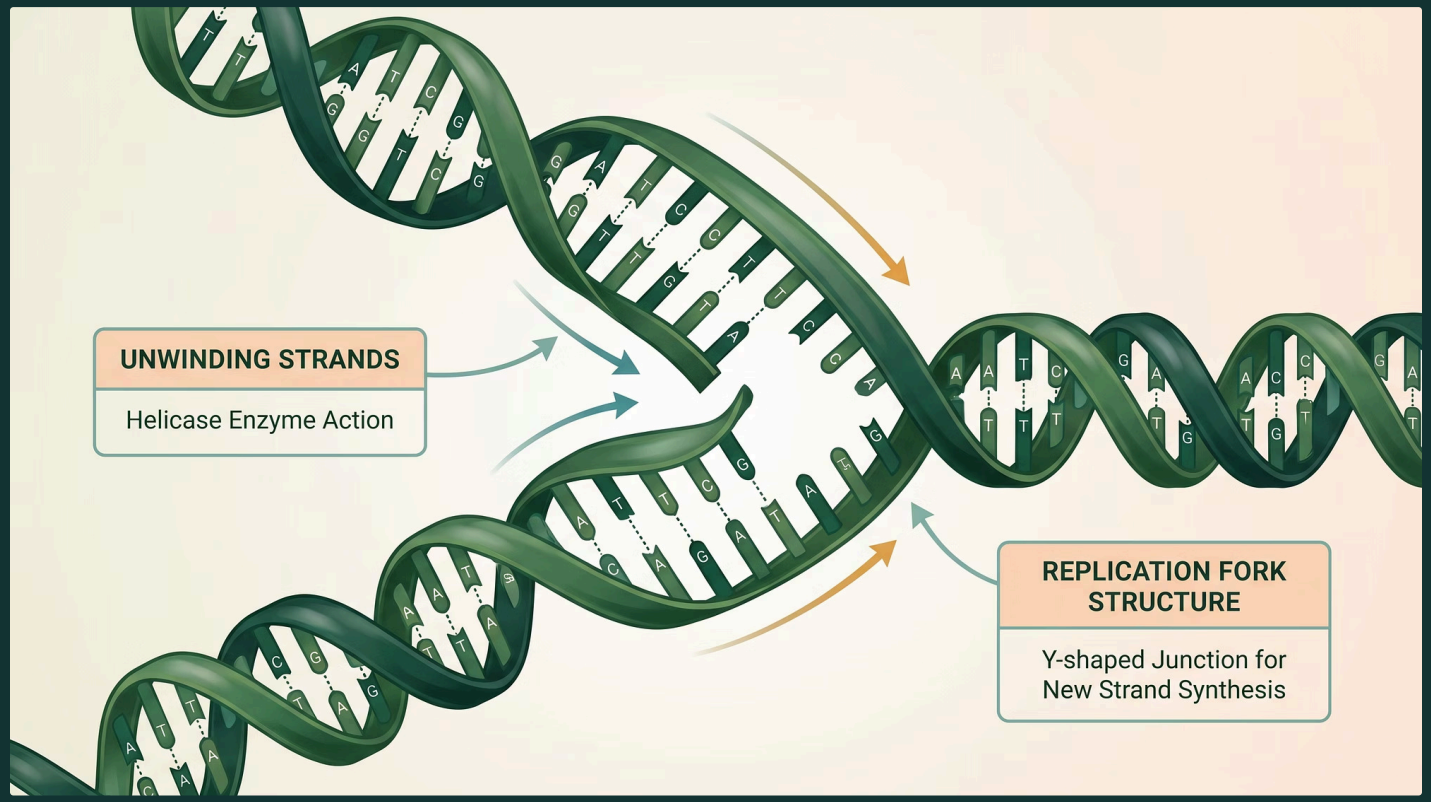
⚡ Elektromanyetik Kuvvet

Çok daha güçlü olsaydı: kimyasal reaksiyonlar gerçekleşemez, yaşam için gereken dinamik süreçler dururdu

🌀 Zayıf Nükleer Kuvvet

Biraz daha güçlü olsaydı: Güneş yakıtını çok hızlı tüketip patlardı; yavaş ve istikrarlı enerji akışı olmazdı

DNA: Fermuar Metaforu ve Bağ Gücünün Önemi



DNA sarmalının iki ipliği hidrojen bağları ile tutulur; bu bağların gücü kritik bir denge noktasındadır.

Yeterince Güçlü

İplikleri bir arada tutacak kadar **güçlü** — genetik bilgi korunur

Yeterince Zayıf

Replikasyon sırasında enzimler tarafından bir fermuar gibi açılabilecek kadar **zayıf** — kopyalama mümkün olur

Kritik Denge

Kovalent bağ kadar güçlü olsaydı DNA ayrılamazdı; Van der Waals kadar zayıf olsaydı genetik bilgi sürekli bozulurdu

Hammadde ve Sanat: Tuğla ile Saray Farkı

Karbon, hidrojen, oksijen, azot — evrenin her yerinde aynı özelliklere sahip standart yapı taşlarıdır.

Standart Yapı Taşları

Kendi başlarına akılsız, şuursuz ve cansızdırlar

Hayret Verici Karmaşıklık

Bu standart atomlardan inşa edilen proteinler, enzimler, hücreler ise hayret verici karmaşıklık ve işlevsellik sergiler

Hemoglobin: Allosterik Tasarım

Hemoglobin yalnızca oksijen taşımaz; ortamın pH'ına ve CO_2 seviyesine göre oksijeni nerede tutup nerede bırakacağını, allosterik düzenleme adı verilen hassas mekanik tasarım belirler

> 💭 Eserdeki sanat, hammaddenin özelliklerinden kaynaklanmaz; hammaddeyi kullanan bir iradeyi gösterir.

Sentez: Sahipsiz Olmayan Bir Mekanizma

Bu derste incelenen her fenomen, birbiriyle bağlantılı üç temel bulguya işaret etmektedir.

Hassas Ayar

Moleküller arası kuvvetlerin büyüklükleri, yaşamın var olabilmesi için gereken çok dar aralıklarda sabitlenmiştir

Amaçlılık

Moleküler düzeydeki tanıma, katlanma ve seçme süreçleri belirli bir hedefe yönelik olarak organize edilmiştir

Bütüncül Sanat

Cansız atomların bir araya gelerek canlılığı oluşturması, parçaların toplamından daha büyük bir bütünün ve bu bütünü kuran bir ilim ve iradenin varlığını akla getirmektedir